



Машинное обучение для решения исследовательских и инженерных задач в науках о Земле

Михаил Криницкий

к.т.н., н.с.

Институт океанологии РАН им. П.П. Ширшова

Лаборатория взаимодействия океана и атмосферы и
мониторинга климатических изменений (ЛВОАМКИ)

ПЛАН ЛЕКЦИИ

- Обобщенные линейные модели (generalized linear models, GLM)
- Обобщенные аддитивные модели (generalized additive models, GAM)
- Искусственная нейронная сеть

Линейная регрессия

$$y_i \sim \mathcal{N}(\mu(\theta, x_i), \sigma^2)$$

$$\eta_i = \theta \cdot x_i$$

$$\mu(\theta, x_i) = \eta_i$$

Линейная регрессия

$$y_i \sim \mathcal{N}(\mu(\theta, x_i), \sigma^2)$$

$$\eta_i = \theta \cdot x_i$$

$$\mu(\theta, x_i) = \eta_i$$

Логистическая регрессия

$$y_i \sim \mathcal{B}(p(\theta, x_i))$$

$$p(\theta, x_i) \propto \exp(\theta_1 \cdot x_i)$$

$$\eta_i^1 = \theta_1 \cdot x_i$$

$$p(\theta_1, x_i) = \text{sigmoid}(\eta_i^1) = \frac{1}{1 + \exp(-\eta_i^1)}$$

Линейная регрессия

$$y_i \sim \mathcal{N}(\mu(\theta, x_i), \sigma^2)$$

$$\eta_i = \theta \cdot x_i$$

$$\mu(\theta, x_i) = \eta_i$$

Логистическая регрессия

$$y_i \sim \mathcal{B}(p(\theta, x_i))$$

$$p(\theta, x_i) \propto \exp(\theta_1 \cdot x_i)$$

$$\eta_i^1 = \theta_1 \cdot x_i = \ln \frac{p_i}{1 - p_i}$$

$$p(\theta_1, x_i) = \text{sigmoid}(\eta_i^1) = \frac{1}{1 + \exp(-\eta_i^1)}$$

Линейная регрессия

$$y_i \sim \mathcal{N}(\mu(\theta, x_i), \sigma^2)$$

$$\eta_i = \theta \cdot x_i$$

$$\mu(\theta, x_i) = \eta_i$$

Логистическая регрессия

$$y_i \sim \mathcal{B}(p(\theta, x_i))$$

$$p(\theta, x_i) \propto \exp(\theta_1 \cdot x_i)$$

$$\eta_i^1 = \theta_1 \cdot x_i = \ln \frac{p_i}{1 - p_i}$$

$$p(\theta_1, x_i) = \text{sigmoid}(\eta_i^1) = \frac{1}{1 + \exp(-\eta_i^1)}$$

Мультиномиальная логистическая регрессия

$$y_{ik} \sim \mathcal{B}(p_k(\theta, x))$$

$$p_k(\theta, x_i) \propto \exp(\theta_k \cdot x_i)$$

$$\eta_i^k = \theta_k \cdot x_i = \ln p_{ik} + C$$

$$p_k(\theta_1, x_i) = \text{softmax}(\eta_i^k, \{\eta_i^k\}) = \frac{\exp \eta_i^k}{C^*}$$

Линейная регрессия

$$y_i \sim \mathcal{N}(\mu(\theta, x_i), \sigma^2)$$

$$\eta_i = \theta \cdot x_i$$

$$\mu(\theta, x_i) = \eta_i$$

Логистическая регрессия

$$y_i \sim \mathcal{B}(p(\theta, x_i))$$

$$p(\theta, x_i) \propto \exp(\theta_1 \cdot x_i)$$

$$\eta_i^1 = \theta_1 \cdot x_i = \ln \frac{p_i}{1 - p_i}$$

$$p(\theta_1, x_i) = \text{sigmoid}(\eta_i^1) = \frac{1}{1 + \exp(-\eta_i^1)}$$

Мультиномиальная логистическая регрессия

$$y_{ik} \sim \mathcal{B}(p_k(\theta, x))$$

$$p_k(\theta, x_i) \propto \exp(\theta_k \cdot x_i)$$

$$\eta_i^k = \theta_k \cdot x_i = \ln p_{ik} + C$$

$$p_k(\theta_1, x_i) = \text{softmax}(\eta_i^k, \{\eta_i^k\}) = \frac{\exp \eta_i^k}{C^*}$$

Обобщенные линейные модели: модели, в которых некоторая функция $g(\cdot)$ мат.ожидания параметра распределения целевой переменной вычисляется как **линейная функция** признакового описания объектов (событий)

$g(\cdot)$ – т.н. функция связи (link function)

Линейная регрессия

$$y_i \sim \mathcal{N}(\mu(\theta, x_i), \sigma^2)$$

$$\eta_i = \theta \cdot x_i$$

$$\mu(\theta, x_i) = \eta_i$$

Логистическая регрессия

$$y_i \sim \mathcal{B}(p(\theta, x_i))$$

$$p(\theta, x_i) \propto \exp(\theta_1 \cdot x_i)$$

$$\eta_i^1 = \theta_1 \cdot x_i = \ln \frac{p_i}{1 - p_i}$$

$$p(\theta_1, x_i) = \text{sigmoid}(\eta_i^1) = \frac{1}{1 + \exp(-\eta_i^1)}$$

Мультиномиальная логистическая регрессия

$$y_{ik} \sim \mathcal{B}(p_k(\theta, x))$$

$$p_k(\theta, x_i) \propto \exp(\theta_k \cdot x_i)$$

$$\eta_i^k = \theta_k \cdot x_i = \ln p_{ik} + C$$

$$p_k(\theta_1, x_i) = \text{softmax}(\eta_i^k, \{\eta_i^k\}) = \frac{\exp \eta_i^k}{C^*}$$

Обобщенные линейные модели: модели, в которых некоторая функция $g(\cdot)$ мат.ожидания параметра распределения целевой переменной вычисляется как линейная функция признакового описания объектов (событий)

$g(\cdot)$ – т.н. функция связи (link function)

Линейная регрессия

$$y_i \sim \mathcal{N}(\mu(\theta, x_i), \sigma^2)$$

$$\eta_i = \theta \cdot x_i$$

$$\mu(\theta, x_i) = \eta_i$$

Логистическая регрессия

$$y_i \sim \mathcal{B}(p(\theta, x_i))$$

$$p(\theta, x_i) \propto \exp(\theta_1 \cdot x_i)$$

$$\eta_i^1 = \theta_1 \cdot x_i = \ln \frac{p_i}{1 - p_i}$$

$$p(\theta_1, x_i) = \text{sigmoid}(\eta_i^1) = \frac{1}{1 + \exp(-\eta_i^1)}$$

Мультиномиальная логистическая регрессия

$$y_{ik} \sim \mathcal{B}(p_k(\theta, x))$$

$$p_k(\theta, x_i) \propto \exp(\theta_k \cdot x_i)$$

$$\eta_i^k = \theta_k \cdot x_i = \ln p_{ik} + C$$

$$p_k(\theta_1, x_i) = \text{softmax}(\eta_i^k, \{\eta_i^k\}) = \frac{\exp \eta_i^k}{C^*}$$

Альтернативно (некорректно, но легче понять):

Обобщенные линейные модели: модели, в которых **мат.ожидание параметра распределения** целевой переменной вычисляется как некоторая **функция $g^{-1}(\cdot)$** от линейной функции η признакового описания объектов (событий) x_i

$g(\cdot)$ – т.н. функция связи (link function)

Как зависит вид функции потерь от вида функции связи?

Как зависит вид функции потерь от вида функции связи?

Линейная регрессия

$$y_i \sim \mathcal{N}(\mu(\theta, x_i), \sigma^2)$$

$$\eta_i = \theta \cdot x_i$$

$$\mu(\theta, x_i) = \eta_i$$

$$p(y_i, x_i, \theta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{(y_i - \mu_i)^2}{2\sigma^2}\right)$$

$$L(\mathcal{T}, \theta) = \prod_{\mathcal{T}} p(y_i, \mu_i)$$

$$\ell(\mathcal{T}, \theta) = \ln L(\mathcal{T}, \theta) = \sum_{\mathcal{T}} \ln p(y_i, \mu_i) = \ln \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \sum_{\mathcal{T}} \left(-\frac{(y_i - \mu_i)^2}{2\sigma^2}\right)$$

$$\theta = \underset{\Theta}{\operatorname{argmax}} \ell(\mathcal{T}, \theta) = \underset{\Theta}{\operatorname{argmin}} \left(\ln \frac{1}{2\sigma^2\sqrt{2\pi\sigma^2}} * \sum_{\mathcal{T}} (y_i - \mu_i)^2 \right)$$

$$\mathcal{L}(\mathcal{T}, \theta) = C \sum_{\mathcal{T}} (y_i - \mu_i)^2$$

Как зависит вид функции потерь от вида функции связи?

Логистическая регрессия

$$y_i \sim \mathcal{B}(p(\theta, x_i))$$

$$p(\theta, x_i) \propto \exp(\theta_1 \cdot x_i)$$

$$\eta_i^1 = \theta_1 \cdot x_i = \ln \frac{p_i}{1 - p_i}$$

$$p(\theta_1, x_i) = \text{sigmoid}(\eta_i^1) = \frac{1}{1 + \exp(-\eta_i^1)}$$

$$L(\mathcal{T}, \theta) = \prod_{\mathcal{T}} p(y_i, p_i) = \prod_{i=1}^N (p_i^{y_i} * (1 - p_i)^{(1-y_i)})$$

$$\ell(\mathcal{T}, \theta) = \ln(L(\mathcal{T}, \theta)) = \sum_i \log(p_i^{y_i}) + \sum_i \log((1 - p_i)^{(1-y_i)}) = \\ = \sum_{\mathcal{T}} (y_i * \log p_i + (1 - y_i) * \log(1 - p_i))$$

$$\theta = \underset{\Theta}{\operatorname{argmax}} \ell(\mathcal{T}, \theta) = \underset{\Theta}{\operatorname{argmin}} \left(- \sum_{\mathcal{T}} (y_i * \log p_i + (1 - y_i) * \log(1 - p_i)) \right)$$

$$\mathcal{L}(\mathcal{T}, \theta) = - \sum_{\mathcal{T}} (y_i * \log p_i + (1 - y_i) * \log(1 - p_i))$$

Как зависит вид функции потерь от вида функции связи?

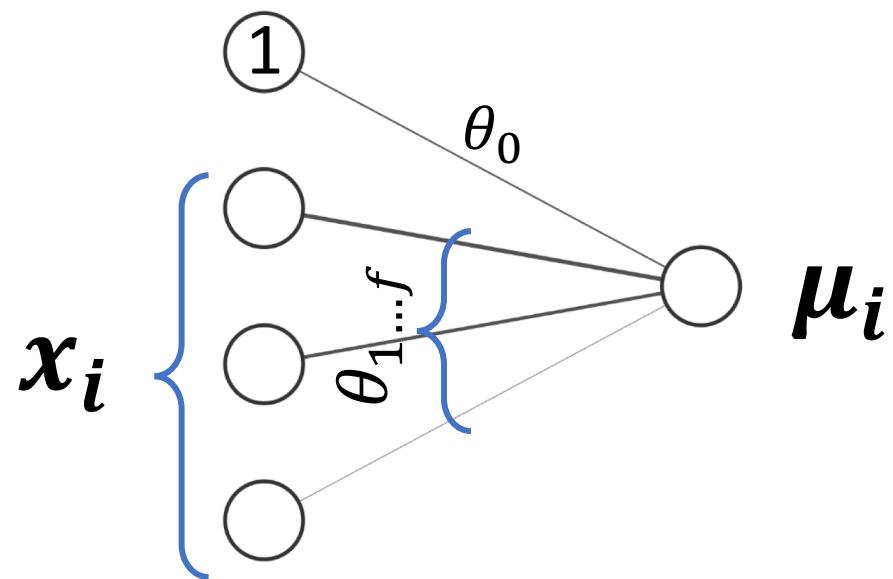
НИКАК

вид функции потерь $\mathcal{L}(\mathcal{T}, \theta)$ зависит от вида распределения целевой переменной y_i , но не от вида функции связи $g(\cdot)$

- обратная функция связи $g^{-1}(\cdot)$ должна отображать R^1 (множество значений произвольной линейной функции $\theta \cdot x_i$) на множество параметров распределения переменной y_i
- вычисление параметра (параметров) распределения переменной y_i в модели производится согласно принципу GLM
- при таких условиях вычисление правдоподобия выборки \mathcal{T} производится независимо от вида функции связи $g(\cdot) \Rightarrow$ вычисление функции потерь в подходе максимизации правдоподобия также производится независимо от вида функции связи $g(\cdot)$

Диаграммы GLM

Линейная регрессия



$$\mathbf{y} \sim \mathcal{N}(\boldsymbol{\mu}, \sigma^2)$$

$$\eta_i = \theta \cdot x_i$$

$$\mu(\theta, x_i) = \boldsymbol{\eta}_i$$

$$\mathcal{L}(\mathcal{T}, \theta) = C \sum_{\mathcal{T}} (y_i - \mu_i)^2$$

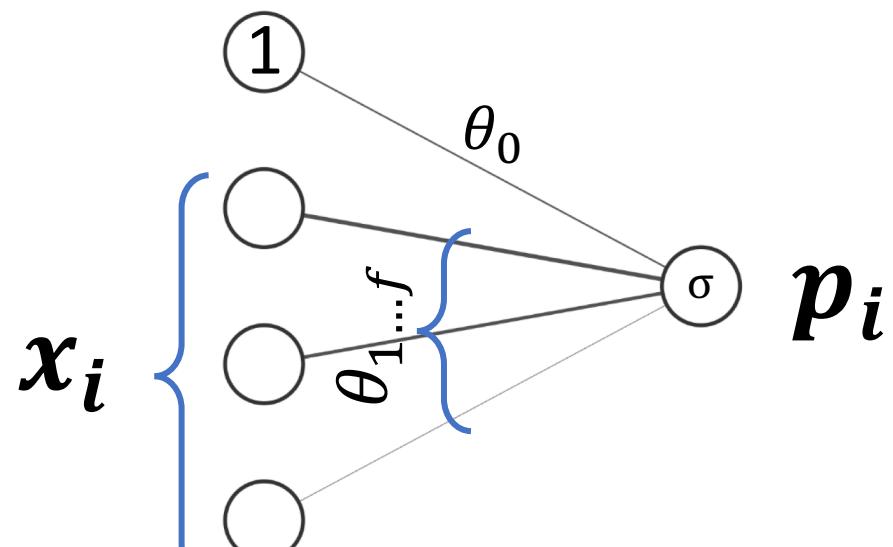
$$\theta = \operatorname{argmin}_{\Theta} (\mathcal{L}(\mathcal{T}, \theta))$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}(\mathcal{T}, \theta)}{\partial \theta} = -2X^T Y + 2X^T X \theta$$

=> градиентная оптимизация

Диаграммы GLM

Логистическая регрессия



$$y_i \sim \mathcal{B}(p(\theta, x_i))$$

$$\eta_i^1 = \theta_1 \cdot x_i$$

$$p(\theta_1, x_i) = \sigma(\eta_i^1)$$

$$\mathcal{L}(\mathcal{T}, \theta) = - \sum_{\mathcal{T}} (y_i * \log p_i + (1 - y_i) * \log(1 - p_i))$$

$$\theta = \operatorname{argmin}_{\Theta} (\mathcal{L}(\mathcal{T}, \theta))$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}(\mathcal{T}, \theta)}{\partial \theta} = - \sum_i (y_i - p(\theta, x_i)) x_i$$

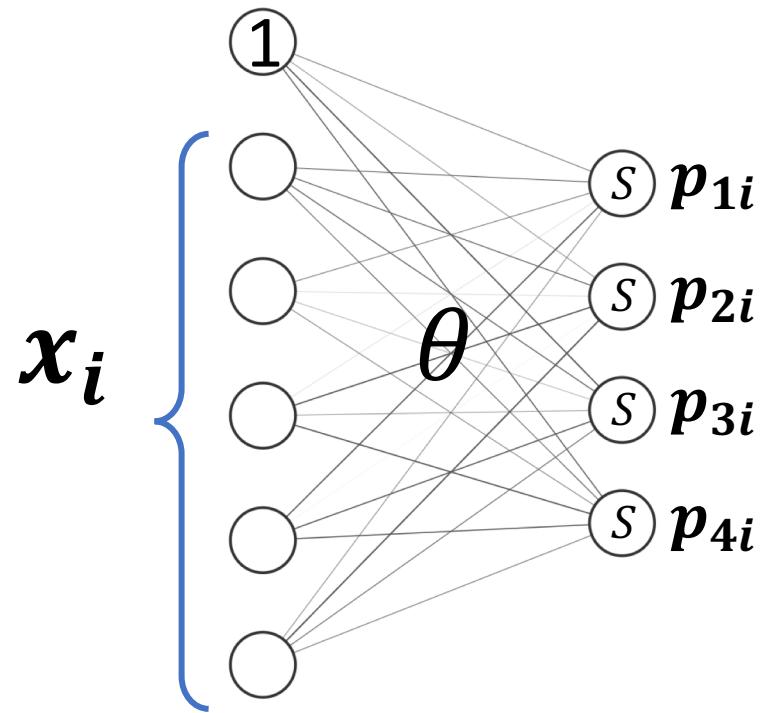
=> градиентная оптимизация

Диаграммы GLM

Мультиномиальная
логистическая регрессия

$$y_{ik} \sim \mathcal{B}(p_k(\theta, x))$$

$$\eta_i^k = \theta_k \cdot x_i = \ln p_{ik} + C$$



$$p_k(\theta_1, x_i) = \text{softmax}(\eta_i^k, \{\eta_i^k\}) = \frac{\exp \eta_i^k}{C^*}$$

$$\mathcal{L}(\mathcal{T}, \theta) = - \sum_{\mathcal{T}} \sum_{k=1}^K ([y_i == k] * \log p_{ik})$$

$$\theta = \operatorname{argmin}_{\Theta} (\mathcal{L}(\mathcal{T}, \theta))$$

$$\nabla_{\theta_k} \mathcal{L}(\mathcal{T}, \theta) = - \sum_{\mathcal{T}} ([y_i == k] - p_{ik}) x_i$$

=> градиентная оптимизация

Регрессия

$$y_i \sim \mathcal{N}(\mu(\theta, x_i), \sigma^2)$$

$$\eta_i = \theta \cdot [f_1(x_i^{(1)}), f_2(x_i^{(2)}), f_3(x_i^{(3)}) \dots f_f(x_i^{(f)})]$$

$$\mu(\theta, x_i) = \eta_i$$

$$y_{ik} \sim \mathcal{B}(p_k(\theta, x))$$

$$p_k(\theta, x_i) \propto \exp(\theta_k \cdot x_i)$$

$$\eta_i^k = \theta \cdot [f_1(x_i^{(1)}), f_2(x_i^{(2)}), f_3(x_i^{(3)}) \dots f_f(x_i^{(f)})] = \ln p_{ik} + C$$

$$p(\theta_1, x_i) = \text{softmax}(\eta_i^k, \{\eta_i^k\}) = \frac{\exp \eta_i^k}{C^*}$$

Бинарная классификация

$$y_i \sim \mathcal{B}(p(\theta, x_i))$$

$$p(\theta, x_i) \propto \exp(\theta_1 \cdot x_i)$$

$$\eta_i^1 = \theta \cdot [f_1(x_i^{(1)}), f_2(x_i^{(2)}), f_3(x_i^{(3)}) \dots f_f(x_i^{(f)})] = \ln \frac{p_i}{1 - p_i}$$

$$p(\theta_1, x_i) = \text{sigmoid}(\eta_i^1) = \frac{1}{1 + \exp(-\eta_i^1)}$$

Мультиномиальная классификация

Обобщенные аддитивные модели – это обобщенные **линейные** модели, в которых некоторая функция $g(\cdot)$ мат.ожидания параметра распределения целевой переменной вычисляется как **линейная функция** некоторых других гладких функций (часто нелинейных, но необязательно) признакового описания объектов (событий)

Регрессия

$$y_i \sim \mathcal{N}(\mu(\theta, x_i), \sigma^2)$$

$$\eta_i = \theta \cdot [f_1(x_i^{(1)}), f_2(x_i^{(2)}), f_3(x_i^{(3)}) \dots f_f(x_i^{(f)})]$$

$$\mu(\theta, x_i) = \eta_i$$

$$y_{ik} \sim \mathcal{B}(p_k(\theta, x))$$

$$p_k(\theta, x_i) \propto \exp(\theta_k \cdot x_i)$$

$$\eta_i^k = \theta \cdot [f_1(x_i^{(1)}), f_2(x_i^{(2)}), f_3(x_i^{(3)}) \dots f_f(x_i^{(f)})] = \ln p_{ik} + C$$

$$p(\theta_1, x_i) = \text{softmax}(\eta_i^k, \{\eta_i^k\}) = \frac{\exp \eta_i^k}{C^*}$$

Бинарная классификация

$$y_i \sim \mathcal{B}(p(\theta, x_i))$$

$$p(\theta, x_i) \propto \exp(\theta_1 \cdot x_i)$$

$$\eta_i^1 = \theta \cdot [f_1(x_i^{(1)}), f_2(x_i^{(2)}), f_3(x_i^{(3)}) \dots f_f(x_i^{(f)})] = \ln \frac{p_i}{1 - p_i}$$

$$p(\theta_1, x_i) = \text{sigmoid}(\eta_i^1) = \frac{1}{1 + \exp(-\eta_i^1)}$$

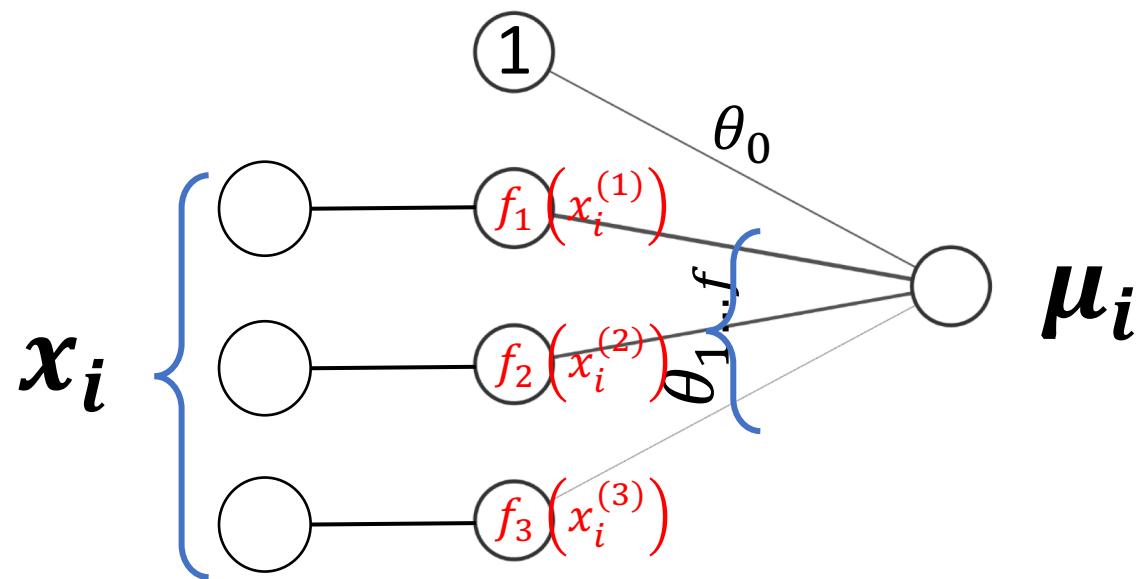
Мультиномиальная классификация

Альтернативно (некорректно, но легче понять):

Обобщенные аддитивные модели – это обобщенные линейные модели, в которых в качестве признаков объектов x_i выступают некоторые гладкие (часто нелинейные) функции этих признаков

Диаграммы GAM

Регрессия



$$\mathbf{y} \sim \mathcal{N}(\boldsymbol{\mu}, \sigma^2)$$

$$\eta_i = \theta \cdot [f_1(x_i^{(1)}), f_2(x_i^{(2)}), f_3(x_i^{(3)}) \dots f_f(x_i^{(f)})]$$

$$\mu(\theta, x_i) = \boldsymbol{\eta}_i$$

$$\mathcal{L}(\mathcal{T}, \theta) = C \sum_{\mathcal{T}} (y_i - \mu_i)^2$$

$$\theta = \operatorname{argmin}_{\Theta} (\mathcal{L}(\mathcal{T}, \theta))$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}(\mathcal{T}, \theta)}{\partial \theta} = ?$$

=> градиентная оптимизация

Диаграммы GAM

Бинарная классификация

$$y_i \sim \mathcal{B}(p(\theta, x_i))$$

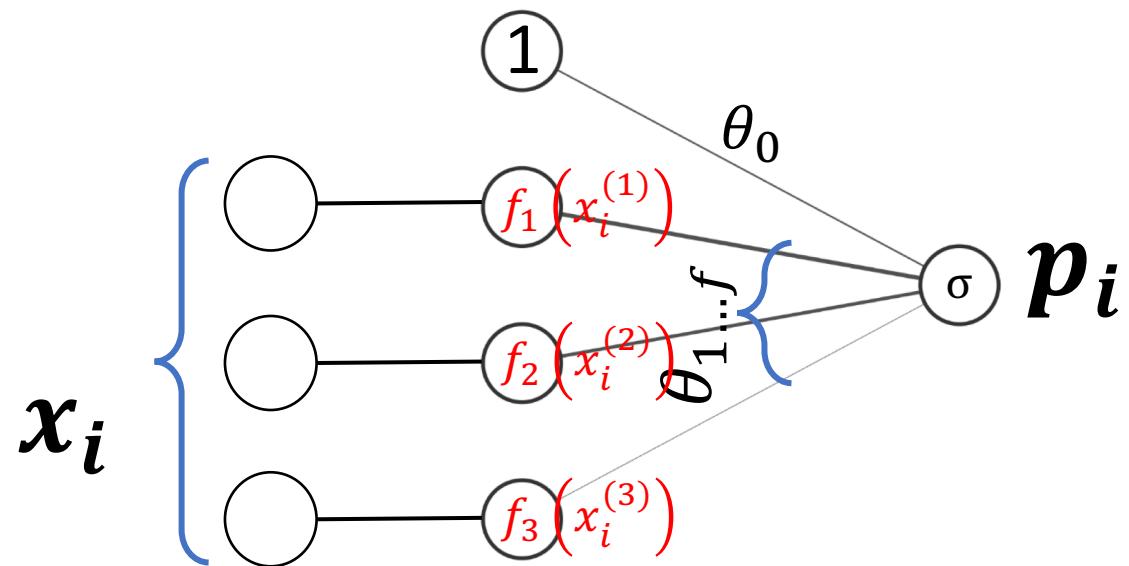
$$\eta_i^1 = \theta \cdot [f_1(x_i^{(1)}), f_2(x_i^{(2)}), f_3(x_i^{(3)}) \dots f_f(x_i^{(f)})]$$

$$p(\theta_1, x_i) = \sigma(\eta_i^1)$$

$$\mathcal{L}(\mathcal{T}, \theta) = - \sum_{\mathcal{T}} (y_i * \log p_i + (1 - y_i) * \log(1 - p_i))$$

$$\theta = \operatorname{argmin}_{\Theta} (\mathcal{L}(\mathcal{T}, \theta))$$

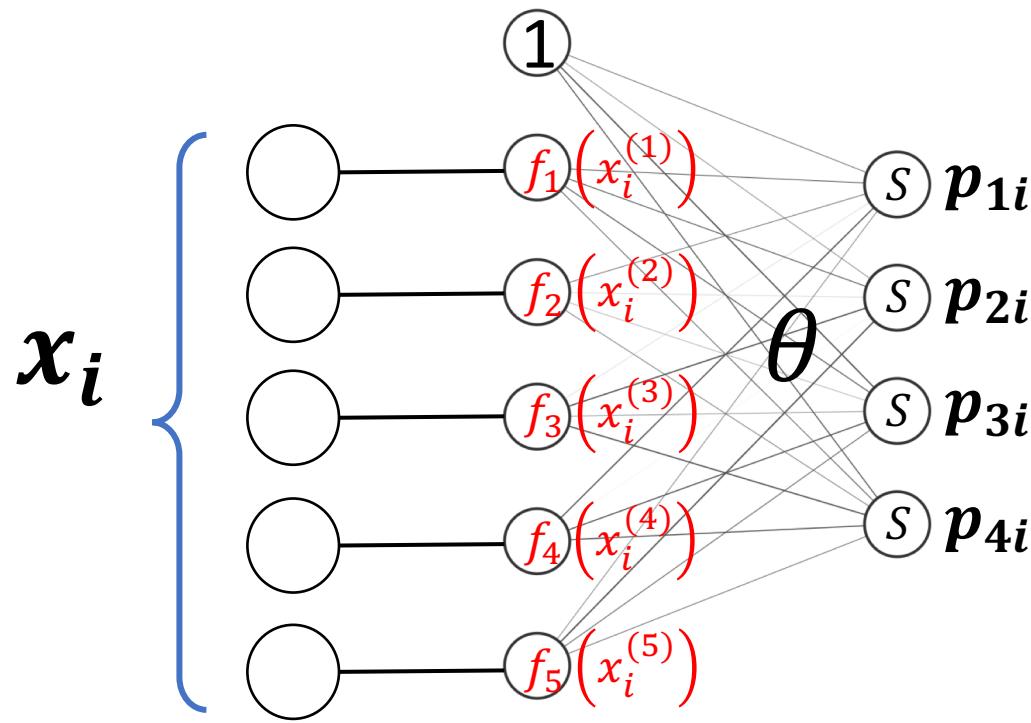
$$\frac{\partial \mathcal{L}(\mathcal{T}, \theta)}{\partial \theta} = ?$$



=> градиентная оптимизация

Диаграммы GAM

Мультиномиальная
классификация



$$y_{ik} \sim \mathcal{B}(p_k(\theta, x))$$

$$\eta_i^k = \theta \cdot [f_1(x_i^{(1)}), f_2(x_i^{(2)}), f_3(x_i^{(3)}) \dots f_f(x_i^{(f)})]$$

$$\ln p_{ik} + C = \eta_i^k$$

$$p_k(\theta_1, x_i) = \text{softmax}(\eta_i^k, \{\eta_i^k\}) = \frac{\exp \eta_i^k}{C^*}$$

$$\mathcal{L}(\mathcal{T}, \theta) = - \sum_{\mathcal{T}} \sum_{k=1}^K ([y_i == k] * \log p_{ik})$$

$$\theta = \underset{\Theta}{\operatorname{argmin}}(\mathcal{L}(\mathcal{T}, \theta))$$

$$\nabla_{\theta_k} \mathcal{L}(\mathcal{T}, \theta) = ?$$

=> градиентная оптимизация

Обобщенные аддитивные модели: за и против

ЗА

- Довольно простые, но при этом предоставляют достаточно свободы в выборе нелинейных преобразований $f_j(x_i^{(j)})$ исходных признаков объектов (событий);
- Подбирать функции f_j - иногда проще, чем подбирать степени полинома;
- Позволяют применять несколько разных нелинейных функций $f_j(x_i^{(j)})$ к разным признакам;
- Модели аддитивные – т.е. можно изучать чувствительность ответа к отдельным входным признакам, просто зафиксировав все остальные.

ПРОТИВ

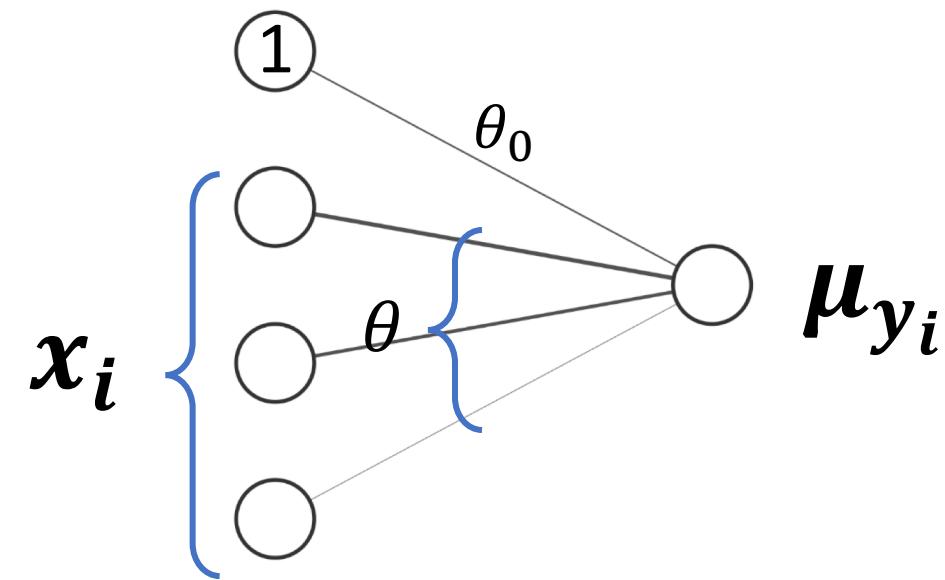
- Это аддитивные модели: учет взаимодействия между признаками ведется только на уровне вычисления линейной функции $g^{-1}(\cdot)$;
- Можно предоставить новые признаки, учитывающие взаимодействие имеющихся, но это не делает сама модель GAM => такие признаки не «обучаемые».

Есть ли способ еще увеличить выразительную способность функциональных параметрических моделей, оставаясь в рамках подхода моделей, обучаемых градиентными методами?

Почти всегда в случае задачи регрессии: $y \sim \mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$

ЛР:

$$\mu_{y_i} = \theta \cdot x_i + \theta_0$$



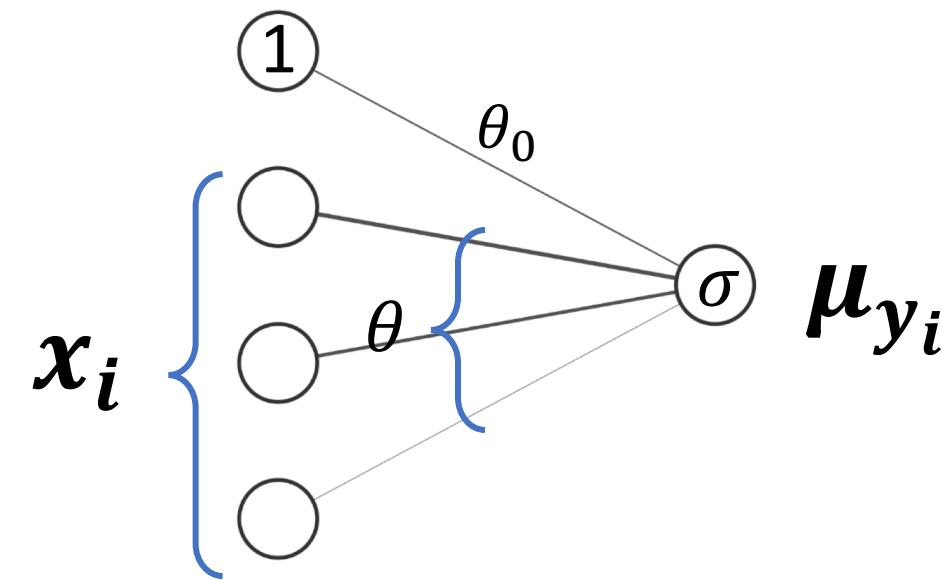
Почти всегда в случае задачи регрессии: $y \sim \mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$

ЛР:

$$\mu_{y_i} = \theta \cdot x_i + \theta_0$$

GLM:

$$\mu_{y_i} = \sigma(\theta \cdot x_i + \theta_0)$$



Почти всегда в случае задачи регрессии: $\mathbf{y} \sim \mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$

ЛР:

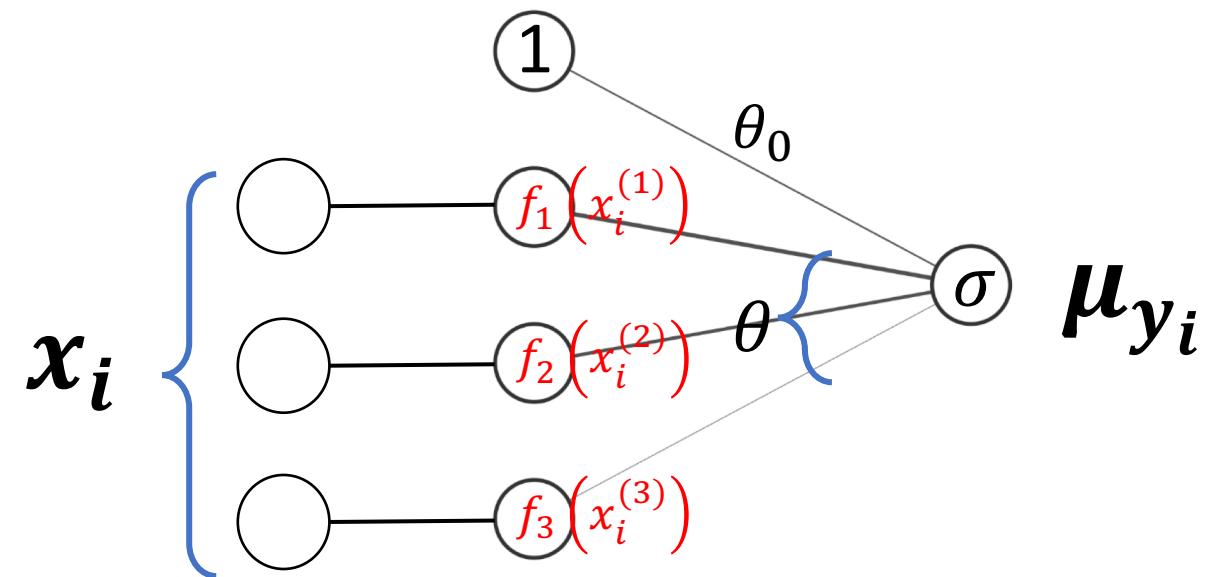
$$\mu_{y_i} = \theta \cdot x_i + \theta_0$$

GLM:

$$\mu_{y_i} = \sigma(\theta \cdot x_i + \theta_0)$$

GAM:

$$\mu_{y_i} = \sigma\left(\theta \cdot [f_1(x_i^{(1)}), f_2(x_i^{(2)}), f_3(x_i^{(3)}) \dots f_f(x_i^{(f)})] + \theta_0\right)$$



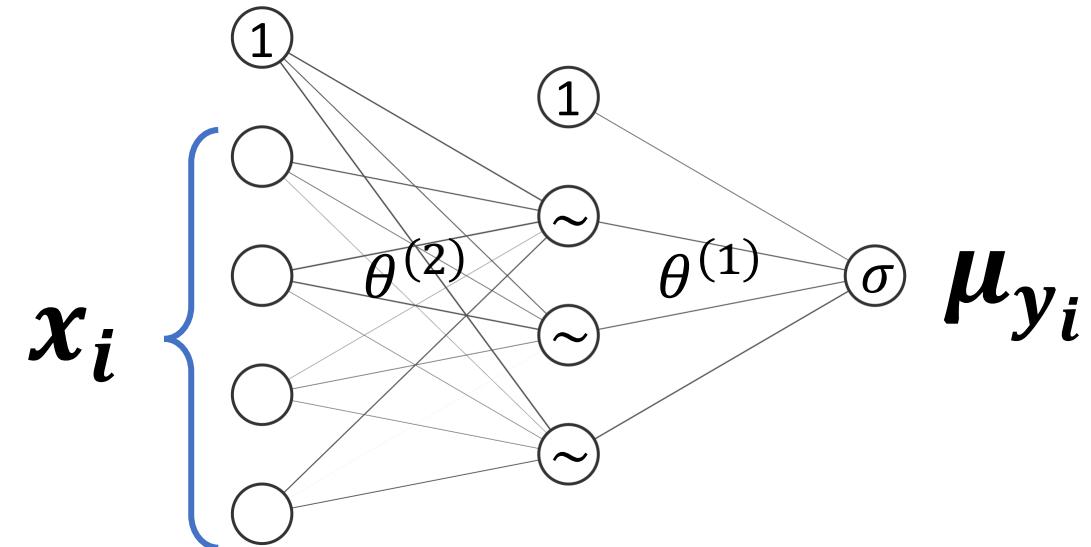
Почти всегда в случае задачи регрессии: $y \sim \mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$

ЛР: $\mu_{y_i} = \theta \cdot x_i + \theta_0$

GLM: $\mu_{y_i} = \phi(\theta \cdot x_i + \theta_0)$

GAM: $\mu_{y_i} = \sigma\left(\theta \cdot [f_1(x_i^{(1)}), f_2(x_i^{(2)}), f_3(x_i^{(3)}) \dots f_f(x_i^{(f)})] + \theta_0\right)$

ИНС: $\mu_{y_i} = \phi\left(\theta_0^{(2)} + \theta^{(2)} \cdot \phi\left(\theta_0^{(1)} + \theta^{(1)} \cdot x_i\right)\right)$



Почти всегда в случае задачи регрессии: $y \sim \mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$

ЛР:

$$\mu_{y_i} = \theta \cdot x_i + \theta_0$$

GLM:

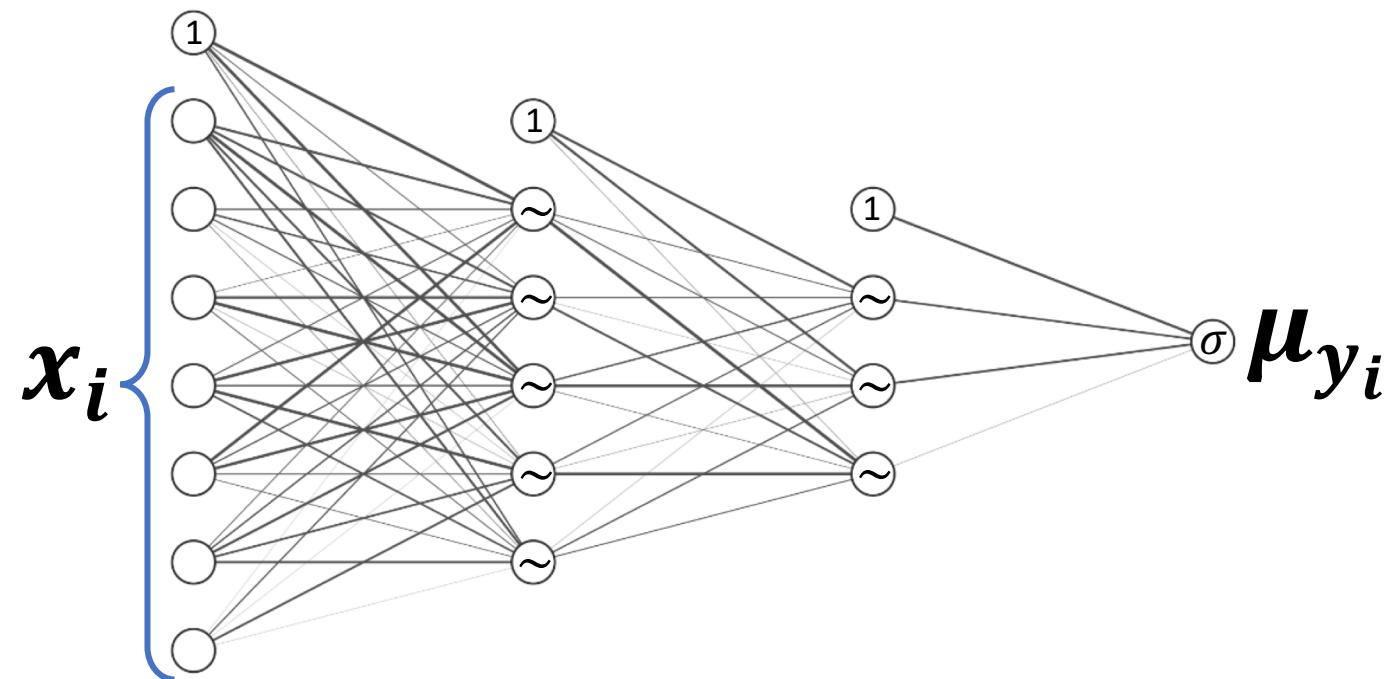
$$\mu_{y_i} = \phi(\theta \cdot x_i + \theta_0)$$

GAM:

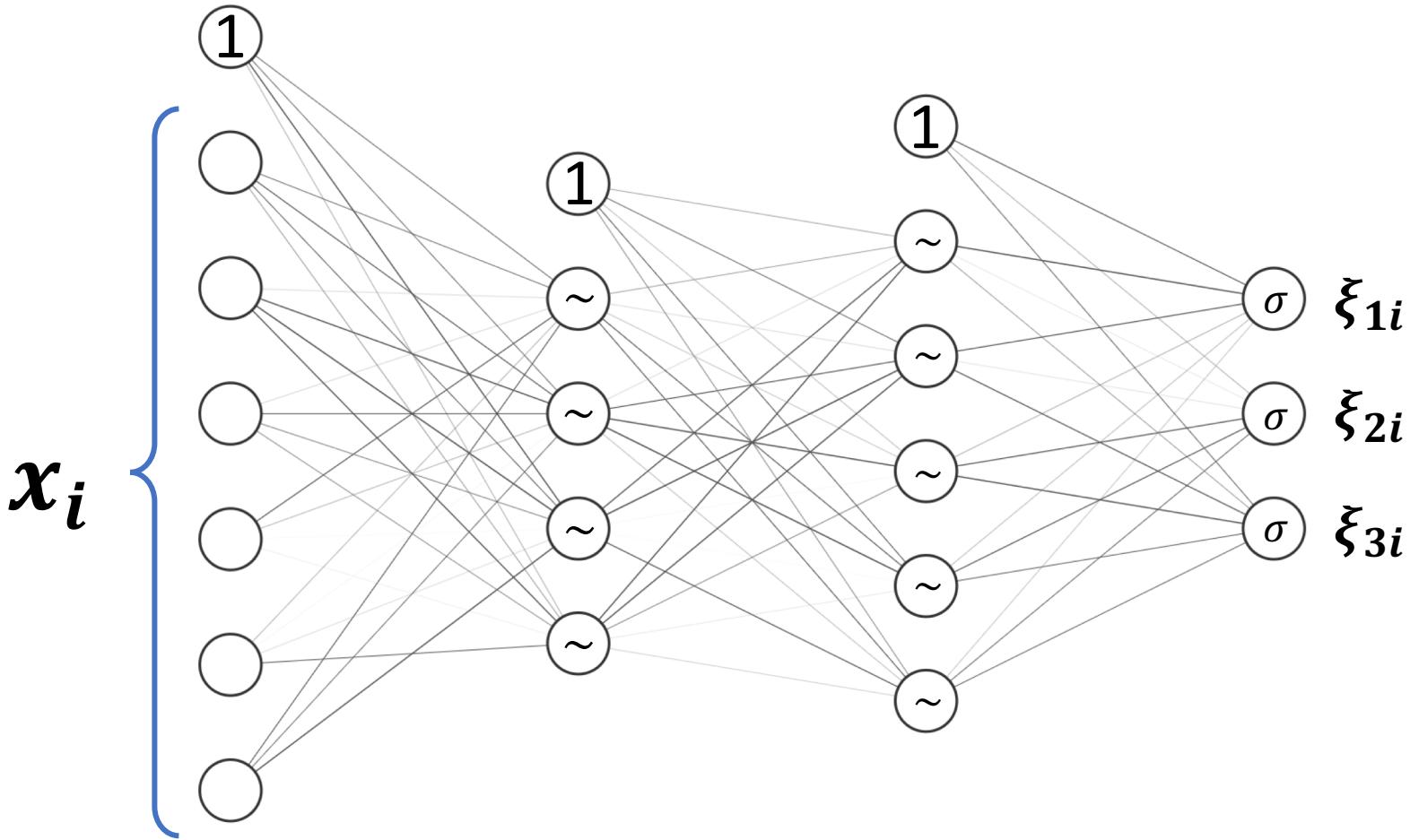
$$\mu_{y_i} = \sigma \left(\theta \cdot [f_1(x_i^{(1)}), f_2(x_i^{(2)}), f_3(x_i^{(3)}) \dots f_f(x_i^{(f)})] + \theta_0 \right)$$

ИНС:

$$\mu_{y_i} = \phi \left(\theta_0^{(3)} + \theta^{(3)} \cdot \phi \left(\theta_0^{(2)} + \theta^{(2)} \cdot \phi \left(\theta_0^{(1)} + \theta^{(1)} \cdot x_i \right) \right) \right)$$



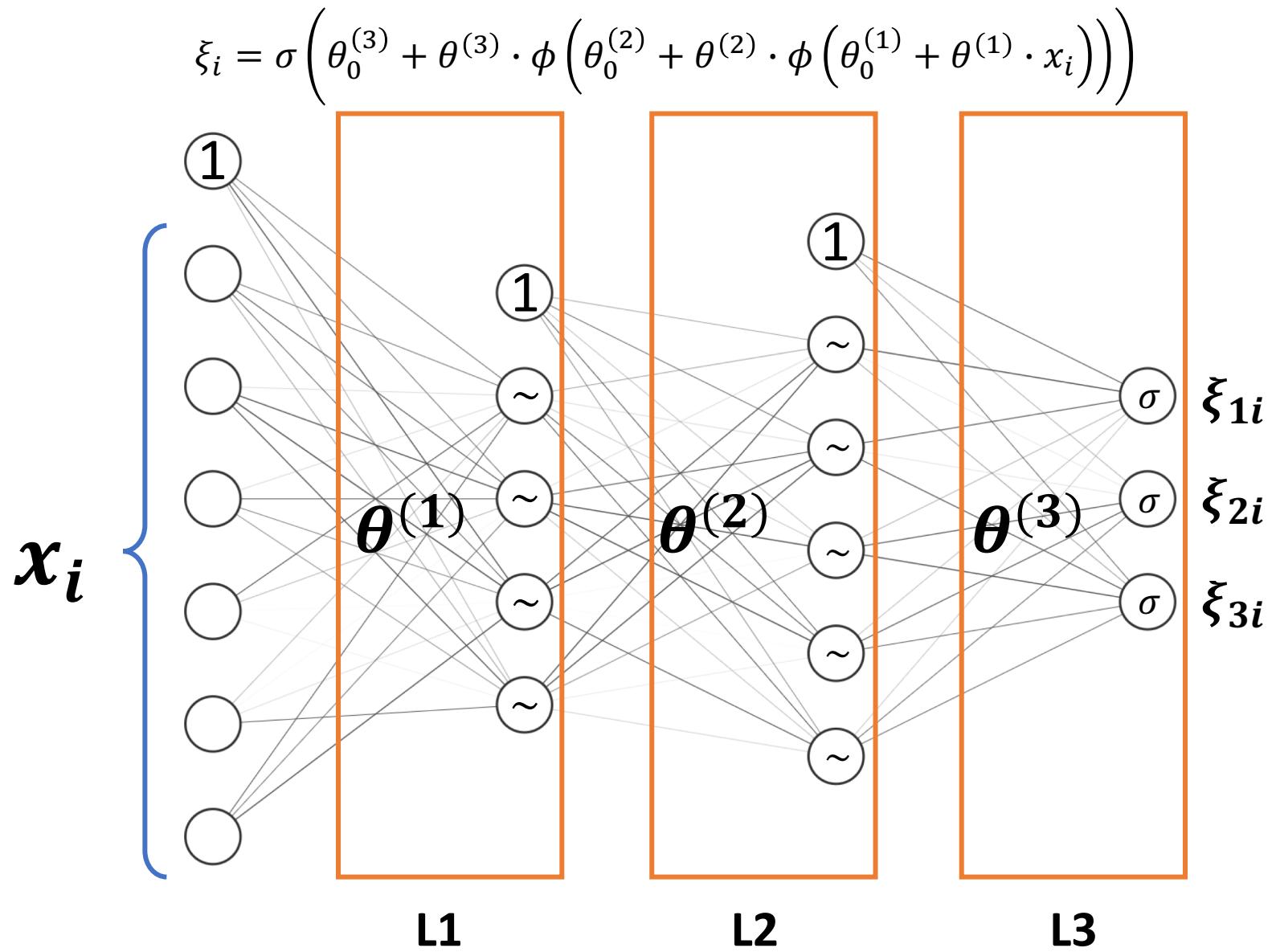
Искусственные нейронные сети



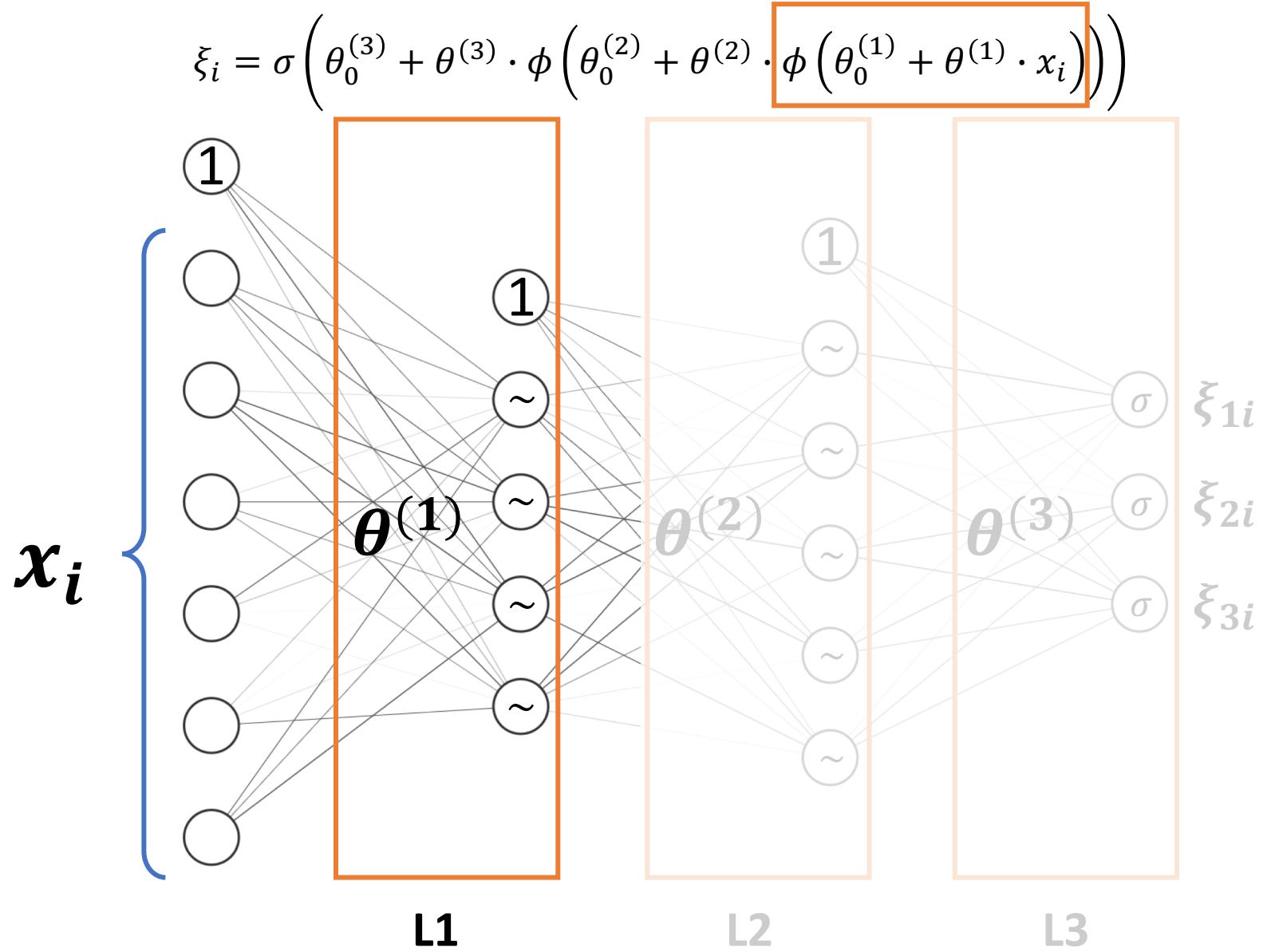
Вид ИНС:

многослойный перцептрон (multilayer perceptron, MLP)
Feedforward NN (FNN, сеть прямого распространения)
полносвязная ИНС (Fully-connected NN, FCNN)

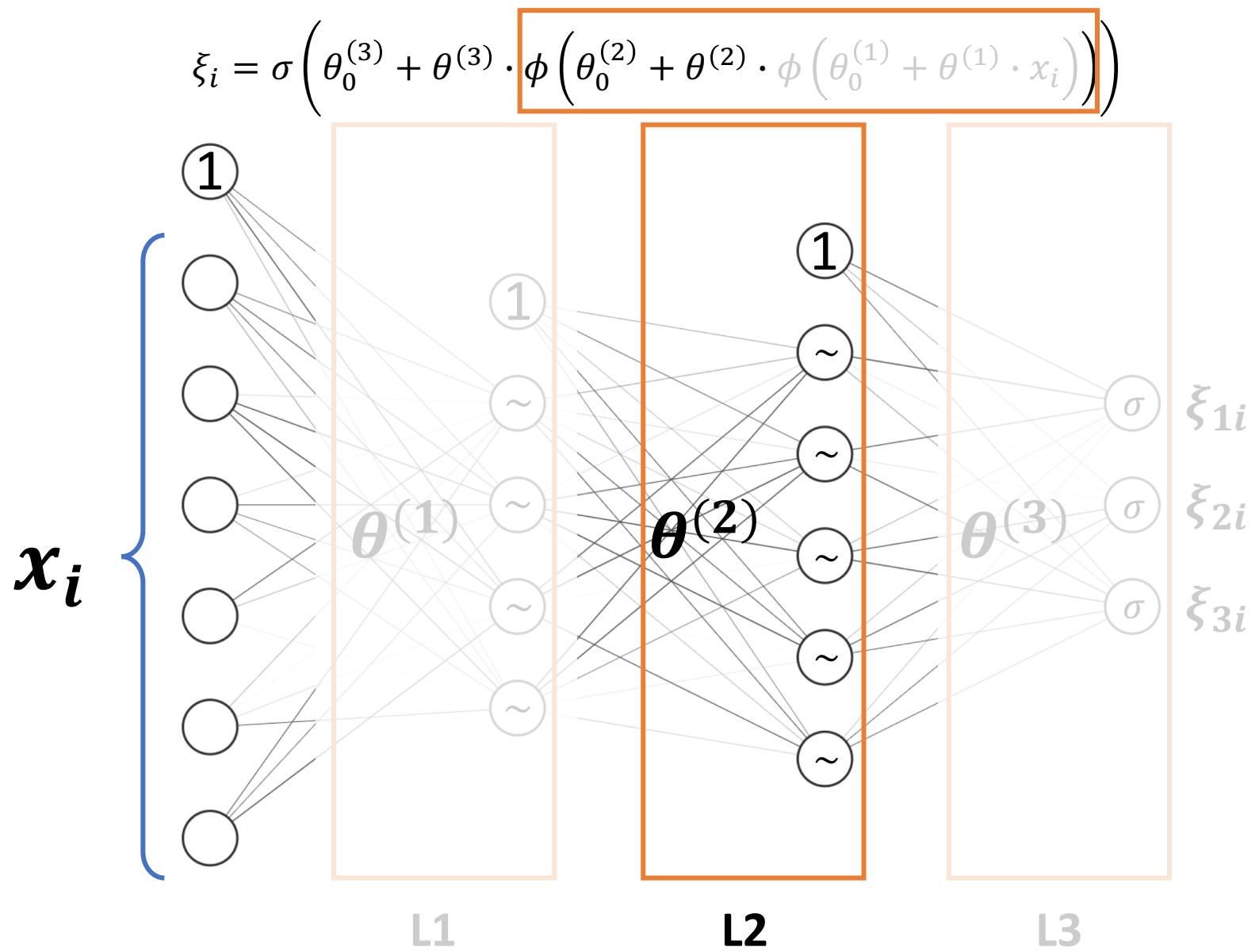
MLP



MLP



MLP



MLP

